

Sultonov Bobur Qobuljon o'g'li

Namangan davlat texnika universiteti katta o'qituvchisi

E-mail: b.sultonov2021@mail.ru

Bozorova Gulshoda Shavkatjon qizi

Namangan davlat texnika universiteti o'qituvchisi

E-mail: b.sultonov2021@mail.ru

UDK:537.311.322

Kubo-Grinvud formulasini amorf yarimo'tkazgichlar uchun qo'llanishi.

Annotatsiya: Maqolada amorf yarimo'tkazgichlarning optik xossalarini nazariy o'rganishda Kubo-Grinvud formulasi asosida olib boriladigan hisoblash usullari tahlil qilinadi. Optik yutilish spektrlari va elektron holatlar zichligi o'rtasidagi bog'liqlik fizik asoslar nuqtayi nazaridan yoritilgan. Amorf kremniy (a-Si) misolida o'tkazilgan modellashtirish natijalari keltirilib, ushbu yondashuvning amaliy ahamiyati va afzalliklari ko'rsatib berilgan.

Kalit so'zlar: amorf yarimo'tkazgich, Kubo-Grinvud formulasi, optik o'tkazuvchanlik, elektron holatlar zichligi, yutilish spektri.

Султонов Бобур

Наманганский государственный технологический университет старший преподаватель

E-mail: : b.sultonov2021@mail.ru

Бозорова Гулшода

Наманганский государственный технологический университет преподаватель

E-mail: : b.sultonov2021@mail.ru

Применение формулы Кубо-Гринвуда к аморфным полупроводникам.

Аннотация: В статье анализируются вычислительные методы, основанные на формуле Кубо-Гринвуда, при теоретическом исследовании оптических свойств аморфных полупроводников. С точки зрения физических основ объяснена связь между спектрами оптического поглощения и плотностью электронных состояний. Представлены результаты моделирования на примере аморфного кремния (a-Si), демонстрирующие практическую значимость и преимущества данного подхода.

Ключевые слова: аморфный полупроводник, формула Кубо-Гринвуда, оптическая проводимость, плотность электронных состояний, спектр поглощения.

Sultonov Bobur Qobuljon ugli

Application of the Kubo-Greenwood formula to amorphous semiconductors.

Abstract: The article analyzes computational methods based on the Kubo-Greenwood formula in the theoretical study of the optical properties of amorphous semiconductors. From the point of view of physical principles, the relationship between the optical absorption spectra and the density of electron states is explained. The results of modeling on the example of amorphous silicon (a-Si) are presented, demonstrating the practical significance and advantages of this approach.

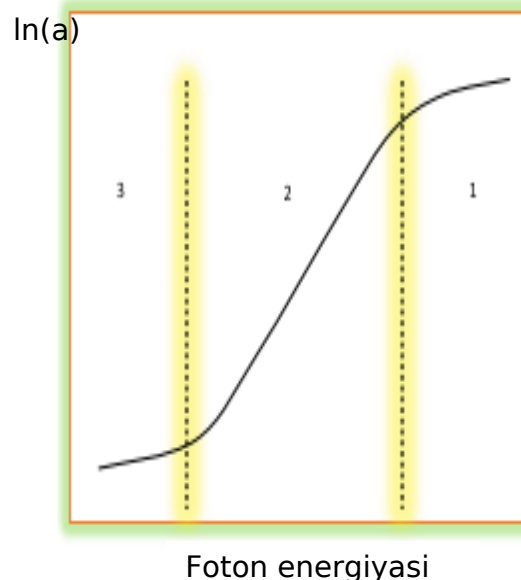
Key words: amorphous semiconductor, Kubo-Greenwood formula, optical conductivity, density of electron states, absorption spectrum.

I. Kirish

Amorf yarimo‘tkazgichlar, so‘nggi yillarda quyosh panellari, sensorlar va displey texnologiyalarida keng qo‘llanilmoqda. Bu materiallarning fizik xossalari, ayniqsa optik yutilish spektrlari, kristall moddalarnikidan sezilarli darajada farq qiladi. Tizimdagi tartibsizlik sababli klassik funksiyalar asosidagi yondashuvlar qo‘llanilmaydi. Shuning uchun Kubo–Grinvud formulasi kabi kvant-statistik yondashuvlar zarur bo‘ladi.

Amorf yarimo‘tkazgichlarning optik yutilish koeffitsiyenti spektral xarakteristikasini yutilgan fotonlarni energiyasiga mos ravishda, sohalarga ajratib tadqiq qilindi (1-rasm). Ana shu sohalardan biri, fundamental yutilish sohasidir. Kristall yarimo‘tkazgichlarda bu sohani zonalararo yutilish sohasi ham deb nomlanadi. Amorf yarimo‘tkazgichlarda bu energetik sohada bir vaqtini o‘zida elektronlarni valent zonasi dumidan o‘tkazuvchanlik zonasiga, valent zonadan o‘tkazuvchanlik zonasiga, valent zonadan o‘tkazuvchanlik zonasi dumiga optik o‘tishlari sodir bo‘ladi. Shuning uchun zonalararo yutilish koeffitsiyenti spektrini ruxsat etilgan zonalaridagi elektron holatlari zichligini taqsimoti ma’lum bo‘lganda Devis-

Mott yaqinlashish usuliga ko‘ra Kubo-Grinvud formulasidan aniqlash mumkin [1].



1-rasm Amorf yarimo‘tkazgichlarning optik yutilish koeffitsiyenti spktral xarakteristikasi yutilgan fotonlarni energiyasiga mos ravishda sohalarga ajratilishi: 1 – zonalararo yutlish sohasi, 2 – eksponensial yutilish sohasi, 3 – nuqsonlarda yutilish sohasi.

Amorf yarimo‘tkazgichlarda elektronlarni optik o‘tishlari bilan aniqlanadigan yutilish ko‘ffisiyenti spektral xarakteristikalarini aniqlaydigan «Kubo-Grinvud formulasi»ni umumiy ko‘rinishda quyidagicha yoziladi [2]

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{8\pi^2 e^2 \hbar^3 \Omega}{(m^*)^2 n_0 c} \int \frac{g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)(f(\varepsilon)-f(\varepsilon+\hbar\omega))}{\hbar\omega} |D|^2 d\varepsilon \quad (1)$$

bu yerda e —elektron zaryadi, $\hbar$ —Plank doimiysi, m^* —elektronlarni effektiv massasi, Ω — ε energiyali elektronni xususiy funksiyasi uchun normallashtirilgan hajm, ω —yutilgan fotonni chastotasi, n_0 —muhitning sindirish ko‘rsatgichi, s —yorug‘lik tezligi, $g(\varepsilon)$ — optik o‘tishda ishtirok etuvchi elektronlarni foton yutilishidan oldingi va $g(\varepsilon+\hbar\omega)$ — keyingi

holatlarining zichliklarining taqsimotlari, $|D|^2$ — elektronlarni optik o‘tishlarining matrisa elementi dispersiyasi, $f(\varepsilon)$ - va $f(\varepsilon+\hbar\omega)$ — Fermi-Dirak taqsimotlari bo‘lib ular quyidagilarga teng:

$$f(\varepsilon) = 1/(1+\exp((\varepsilon-\varepsilon_F)/kT)),$$

$$f(\varepsilon+\hbar\omega) = 1/(1+\exp((\varepsilon-\varepsilon_F+\hbar\omega)/kT)).$$

Fermi-Dirak taqsimotlaridagi $\varepsilon_F < 0$, $\varepsilon < 0$, $\varepsilon < \varepsilon_F$ va $\hbar\omega > \varepsilon - \varepsilon_F$ bo‘lganligi uchun, yutilgan fotonlarni energiyasi fononlarni energiyasidan juda katta bo‘lganda, ya‘ni $\hbar\omega \gg kT$:

$$\exp((\varepsilon-\varepsilon_F)/kT) \approx 0,$$

$$\exp((\varepsilon-\varepsilon_F+\hbar\omega)/kT) \approx \infty,$$

larga teng bo‘ladi deb olinishi mumkin. Shuning uchun Fermi-Dirak taqsimotlarini $f(\varepsilon) \approx 1$ va $f(\varepsilon+\hbar\omega) \approx 0$ teng bo‘ladi. Bu hol uchun Kubo-Grinvud formulasi quyidagi ko‘rinishga keladi:

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{8\pi^2 e^2 \hbar^3 \Omega}{(m^*)^2 n_0 c} \int \frac{g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)}{\hbar\omega} |D|^2 d\varepsilon \quad (2)$$

II. Hisoblash. Kubo-Grinvud formulasini Devis-Mott yaqinlashish usuli bo‘yicha hisoblashda elektronlarni bitta turdagi optik

o‘tishlari uchun, $|D|^2$ —elektronlarni optik o‘tishlarining matrisa elementi dispersiya o‘zgarmas bo‘ladi deb, uni integral ostidan chiqarib yoziladi: Zonalararo o‘tishlar uchun,

$\frac{m}{m^*} = 1$ va $k = \frac{\pi}{a}$ bo‘lganda (k - elektronlarning to‘lqin soni, a - esa

o‘rganilayotgan namunaning atomlari orasidagi o‘rtacha masofa),

$$D = \pi \left(\frac{a}{\Omega} \right)^{1/2} \text{ ko‘rinishda yozish mumkin [3].}$$

Bundan foydalanib amorf yarimo‘tkazgichlar uchun Devis – Mott yaqinlashish usuliga ko‘ra, fotonlarni zonalararo yutilish spektri uchun Kubo-Grinvud formulasini quyidagi ko‘rinishda yoziladi

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{8\pi^4 e^2 \hbar^2 a}{m^2 n_0 c} \int \frac{g_V(\varepsilon)g_C(\varepsilon+\hbar\omega)}{\hbar\omega} d\varepsilon \quad (3)$$

[4] ishlarda bu formulani hisoblash usullari keltirilgan. (3) formulani:

$$\alpha(\hbar\omega) = A \int \frac{g_V(\varepsilon)g_C(\varepsilon+\hbar\omega)}{\hbar\omega} d\varepsilon, \quad (4)$$

ko‘rinishda yozilgan. Bu yerda A — yutilgan fotonlarni chastotasiga bog‘liq bo‘lmagan

$$A = \frac{8\pi^4 e^2 \hbar^2 a}{m^2 n_0 c}$$

proporionallik ko‘ffisiyenti

[5] ishda valent va o‘tkazuvchanlik zonalarining chegaralaridagi elektron holatlari zichliklarning taqsimotlari darajali bo‘lishi ko‘rsatilgan va ular quyidagi ko‘rinishda bo‘lishi keltirilgan: valent zonasini shifti yuqorisi chegarasi yaqinida

$$g_V(\varepsilon) = C_1 (\varepsilon_B - \varepsilon)^p, \quad \varepsilon \leq \varepsilon_B \quad (5)$$

o‘tkazuvchanlik zonasi tubi yaqinida

$$g_C(\varepsilon) = C_2 (\varepsilon - \varepsilon_A)^s, \quad \varepsilon_A \leq \varepsilon \quad (6)$$

bu yerda C_1 , C_2 – o‘zgarmaslar, p va s lar $1/2$ va 1 qiymatlarga ega bo‘lishi mumkin [6].

ε_A – o‘tkazuvchanlik zonasining tubining energetik o‘rni, ε_B – valent zonasi shiftining energetik o‘rni bo‘lganligi uchun:

$$\varepsilon_B = \varepsilon_V, \quad \varepsilon_A - \varepsilon_C, \quad \varepsilon_A - \varepsilon_B = \varepsilon_C - \varepsilon_V = E_g.$$

Bu yerda E_g xarakatchanlik tirqishining energetik kengligi. So‘ngra quyidagi belgilashni kiritilgan:

$$y = \frac{\varepsilon_A - \hbar\omega - \varepsilon}{\varepsilon_A - \hbar\omega - \varepsilon_B}, \quad 0 \leq y \leq 1. \quad (7)$$

Bu ifodani differensiallab quyidagi ifoda olingan:

$$dy = \frac{-1}{\varepsilon_A - \hbar\omega - \varepsilon_B} d\varepsilon = \frac{1}{\hbar\omega - E_g} d\varepsilon \quad (8)$$

Devis - Mott yaqinlashish usuliga ko'ra Kubo - Grinvud formulasini qo'yidagi ko'rinishda yozilgan:

$$\alpha(\hbar\omega) = A \int \frac{C_1(\varepsilon_B - \varepsilon)^p C_2(\varepsilon - \varepsilon_A + \hbar\omega)^s}{\hbar\omega} d\varepsilon \quad (9)$$

(6) formuladan foydalanib quyidagi ifodalar olingan:

$$\varepsilon - \varepsilon_A = y(\hbar\omega - E_g) - \hbar\omega, \quad (10)$$

$$\varepsilon_B - \varepsilon = (1-y)(\hbar\omega - E_g) \quad (11).$$

(7), (10) va (11) ni (8) ga qo'yib:

$$\alpha(\hbar\omega) = AC_1 C_2 \int \frac{(1-y)^p y^s (\hbar\omega - E_g)^{p+s+1}}{\hbar\omega} dy$$

$$= C \frac{(\hbar\omega - E_g)^{p+s+1}}{\hbar\omega} \int (1-y)^p y^s dy \quad (12)$$

y ni o'zgarish chegarasini hisobga olib, bu integralni quyidagi ko'rinishda yozilgan:

$$\alpha(\hbar\omega) = C \frac{(\hbar\omega - E_g)^{p+s+1}}{\hbar\omega} \int_0^1 (1-y)^p y^s dy \quad (13)$$

Bu ifodadagi integralni gamma funksiya orqali quyidagi ko'rinishda yozilgan:

$$\int_0^1 (1-y)^p y^s dy = \frac{\Gamma(s+1)\Gamma(p+1)}{\Gamma(s+p+2)} \quad (14)$$

Bundan foydalanib zonalararo yutilish koeffitsiyenti spektri uchun quyidagi ifodani olingan:

$$\alpha(\hbar\omega) = C \frac{\Gamma(s+1)\Gamma(p+1)}{\Gamma(s+p+2)} \frac{(\hbar\omega - E_g)^{p+s+1}}{\hbar\omega} \quad (15)$$

(13) integralni hisoblash uchun gamma funksiya foydalanish shart emas. Chunki bu formuladagi p va s lar 1/2 va 1

qiymatlar ega bo'lganda (13) integralni analitik yechimlarini olish mumkin.

1. p = 1/2 va s = 1/2 bo'lganda

$$\int_0^1 (1-y)^{1/2} y^{1/2} dy = \frac{1}{4} ((2y-1)\sqrt{y(1-y)} + \arctg \sqrt{\frac{y}{1-y}}) \Big|_0^1 = \frac{\pi}{8}, \quad (16)$$

2. p = 1/2 va s = 1 bo'lganda

$$\int_0^1 (1-y)^{1/2} y^1 dy = -\frac{2(3y+1)}{15} \sqrt{(1-y)^3} \Big|_0^1 = \frac{4}{15}, \quad (17)$$

3. p = 1 va s = 1/2 bo'lganda

$$\int_0^1 (1-y)^1 y^{1/2} dy = -\frac{4}{15} \sqrt{(1-y)^5} \Big|_0^1 = \frac{4}{15}, \quad (18)$$

4. p = 1 va s = 1 bo'lganda esa,

$$\int_0^1 (1-y)^1 y^1 dy = \left(\frac{y^2}{2} - \frac{y^3}{3} \right) \Big|_0^1 = \frac{1}{6}. \quad (19)$$

Ammo, aytib o'tish kerakki, gamma funksiya bo'yicha bajarilgan hisoblashlar ham xuddi shunday natijalarni beradi. Misol uchun p=1 va s=1 bo'lganda quyidagi natijani olamiz:

$$\int_0^1 (1-y)^1 y^1 dy = \frac{\Gamma(1+1)\Gamma(1+1)}{\Gamma(1+1+2)} = \frac{1}{6}. \quad (20)$$

(15) ifodadan foydalanib zonalararo yutilish koeffitsiyenti spektral xarakteristikasi uchun quyidagi ifodalar olingan:

1. p = 1/2 va s = 1/2 bo'lganda

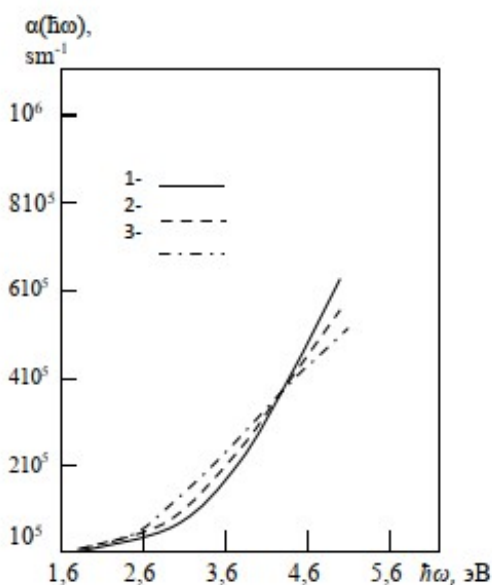
$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{\pi C}{8} \frac{(\hbar\omega - E_g)^2}{\hbar\omega}, \quad (21)$$

2. p = 1/2 va s = 1, hamda p = 1 va s = 1/2 bo'lganda

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{4C}{15} \frac{(\hbar\omega - E_g)^{5/2}}{\hbar\omega}, \quad (22)$$

3. $p = 1$ va $s = 1$ bo'lganda esa,

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{C}{6} \frac{(\hbar\omega - E_g)^3}{\hbar\omega} \quad (23)$$



2-rasm (21), (22) va (23) formulalardan hisoblangan zonalararo yutilish spektrlari.

Adabiyotlar

- [1] Ikramov R.G., Nuriddinova M.A., Muminov Kh.A. *Spectra of the coefficient of defect absorption and the energy position of defects in amorphous hydrogenated silicon*. International Journal of Multidisciplinary Trends. 1(1), 12 (2019).
- [2] Ikramov R.G., Mamaxanov A.A., Nuriddinova M.A., Jalalov R.M., Muminov Kh.A. and Sultanov B.Q. *Calculation of the interband absorption spectra of amorphous semiconductors using the Kubo-Greenwood formula*. Journal of Applied Science and Engineering. 25(5), 767 (2021)
- [3] Zainobidinov S., Ikramov R.G., Nuriddinova M.A., Zhalalov R.M. *Temperature effect in absorption spectra of amorphous semiconductors*. Ukr. J. Phys., 53(8), 789 (2008)
- [4] Zainobidinov S., Ikramov R.G., Zhalalov R.M. and Nuriddinova M.A. *Distribution of electron density of states in allowed bands and interband absorption in amorphous semiconductors*. Optics and spectroscopy, 110(5), 762 (2011)
- [5] Фистуль И.В. *Введение в физику полупроводников*. (Москва, Высшая школа, 1984), 352 с.

III. Xulosa. Kubo–Grinvud formulasi amorf yarimo‘tkazgichlarning optik xossalari aniqlashda samarali nazariy vosita hisoblanadi. Bu yondashuv yordamida yutilish spektrining shakli, energiya oralig‘i va elektron o‘tishlarning intensivligi aniqlanishi mumkin. Amorf materiallarning dizayni va optimallashtirilgan qurilmalar yaratishda ushbu metodikani qo‘llash katta ahamiyat kasb etadi.